

ESPECTROSCOPIA MOLECULAR

Año - 1973

A cargo de: Dra. Olga Brioux de Mandirola
Dra. Hilda Pezzano

CAPITULO I: INTRODUCCION: métodos fisicoquímicos para determinar estructuras moleculares. Niveles de energía de átomos y moléculas (aspectos cuánticos). Curvas de energía potencial. Interacción materia-radiación. Métodos espectroscópicos: espectroscopía de rotación pura y de vibración. Absorción en el infrarrojo y difusión Raman. Vibración-rotación. Espectroscopía electrónica. Instrumentos espectroscópicos: a prisma y paredes. otros métodos.

CAPITULO II: (MOLECULAS DIATOMICAS) ROTACION Y VIBRACION: Movimiento nuclear. El rotor rígido. El oscilador armónico. El espectro del oscilador armónico. El oscilador anarmónico. Funciones de energías potencial. El espectro del oscilador anarmónico. El rotor vibrador, sus estados rotacionales.

CAPITULO III: (MOLECULAS DIATOMICAS) LA SIMETRIA DE FUNCIONES DE ONDA MOLECULARES: Transformaciones de simetría. Moléculas homonucleares. Distribución de intensidades en las estructuras rotacionales. EFEECTO RAMAN: La dispersión de la luz. Teoría clásica. Teoría cuántica. Espectroscopía experimental Raman.

CAPITULO IV: (MOLECULAS DIATOMICAS) Transiciones electrónicas: Espectros de bandas. Interacciones rotación- electrónicos. Reglas de selección. Transiciones singulete- singulete y Multiplete- Multiplete. La clasificación de simetría de niveles rotacionales. Estructuras vibracionales: transiciones, momentos e intensidades. El principio de Franck Condon. Espectro de bandas electrónicas en absorción. Teoría de perturbaciones en interacciones. Espectro continuo y predispersión.

CAPITULO V: (MOLECULAS POLIATOMICAS) SIMETRIA: Teoría de grupos, operaciones de simetría, elementos de simetría. Algebra de grupos. Tabla de caracteres. Aplicaciones: Transformación de coordenadas, traslación, rotación y vibración. Estados electrónicos. Representación de productos directos. Integrales sobre el espacio de configuraciones.

CAPITULO VI: (MOLECULAS POLIATOMICAS) ROTACION: niveles de energía, estados rotacionales, espectros rotacionales. Tipos de rotores. Estados rotacionales y sus espectros.

VIBRACION: Movimiento vibracional. Movimiento en coordenadas cartesianas, coordenadas generalizadas, coordenadas normales y coordenadas internas. Teoría de grupo en vibraciones: simetría de vibraciones normales, representación en coordenadas cartesianas. Movimiento...

///... Hoja N°2

to en coordenadas de simetría. Autovalores y autoestados vibracionales. Simetría de las funciones de onda vibracionales. Momento angular vibracional. Espectro vibracional y reglas de selección. Espectro Raman: polaridad. Reglas de selección. Rotación-Vibración: interpretación de espectros.

CAPITULO VII: (MOLECULAS POLIATOMICAS) ESPECTROSCOPIA ELECTRONICA: Estados electrónicos de moléculas poliatómicas. Términos electrónicos y vibracionales. Electrónicos y Vibronicos, reglas de selección, interacciones. El efecto Jahn Teller y Renner. Diagramas de correlación.

CAPITULO VIII: RESONANCIAS MAGNETICAS NUCLEAR Y DEL SPIN ELECTRONICO: Equilibrio técnico. Interacciones magnéticas. Espectros de resonancia magnética del átomo de Hidrógeno. Funciones básicas de spin. Energías hiperfinas. Idem para el átomo de Helio. Apantallamiento químico.

CAPITULO IX: RESONANCIA NUCLEAR DEN SOLIDOS: Tensor de acoplamiento dipolar. Estudios estructurales por el método de los momentos. Espectros de resonancia nuclear en líquidos. Corrimiento químico. Acoplamiento spin-spin. Interpretación.

CAPITULO X: RESONANCIA MAGNETICA DE RADICALES: en solución y atrapados en matrices sólidas. Distribución de spin en moléculas de radicales. Relajación. Ecuaciones de Bloch. Forma y ancho de línea- Modos de absorción y dispersión.

CAPITULO XI: TEORIA DEL TENSOR "g": Espectros de monocristales d y de polvos. ESPECTROS EN VISIBLE: Análisis.

CAPITULO XII: OTROS METODOS: Momento Dipolar. Efecto de fluorescentes y fosforescencia.

